

Промежуточный отчет по гранту 19-38-90314 Аспиранты «Математическое моделирование влияния реакции диссоциации/рекомбинации на перенос ионов соли» - второй этап реализации проекта

Аннотация, публикуемая на сайте РФФИ (кратко - описать содержание проведенного исследования и полученные результаты за отчетный период)

Второй этап реализации проекта является логическим продолжением первого, с учетом усложнения задач в соответствии с грантом. Проведены исследования по заявленным в гранте планам – разработаны и численно решены математические модели переноса ионов бинарной соли с учетом реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды в одномерном (1D) сечении канала обессоливания и двумерном (2D) канале обессоливания с учетом электроконвекции. В связи с многообразием 1D моделей проведена их классификация по свойствам уравнений, стационарности, области исследования, явлениям и свойствам раствора. В ходе исследования обнаружено новое явление в электромембранных системах – пробой пространственного заряда, установлены причины образования и свойства солитоноподобных волн заряда при сверхпредельных токовых режимах. Определены зависимости волн заряда от коэффициентов диффузии, начальной и граничной концентрации. Изучены особенности переноса ионов на каждом этапе пробоя. Установлена структура канала обессоливания и его сечения до, во время, после пробоя, а также в квазистационарном состоянии. Определено влияние некаталитической реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды на перенос ионов соли в исследуемых моделях и электроконвекцию в 2D моделях. По результатам работы в рамках гранта за второй этап опубликовано 1 статья (Scopus) и 1 статья (Scopus) отправлена в печать. Разработаны и зарегистрированы 2 программы для ЭВМ, 4 статьи, индексируемы в РИНЦ, опубликованы в сборниках трудов Международных конференции, 2 тезиса во Всероссийских конференциях.

Важнейшие результаты, полученные за два (первый и второй) этапа реализации проекта

За два этапа реализации проекта, как и планировалось, разработаны новые и модифицированы существующие 1D и 2D математические модели переноса ионов бинарной соли. Установлены основные закономерности переноса ионов в диффузионном слое у ионообменной мембраны, в канале обессоливания (КО) и его сечении с учетом реакции диссоциации (рекомбинации) молекул воды и температурных эффектов. Осуществлено сопоставление теоретически установленных закономерностей переноса ионов с экспериментальными данными, как в допредельном, так и в запредельном токовых режимах.

Разработана классификация одномерных математических моделей переноса ионов бинарной соли в ЭМС по свойствам уравнений, области исследования,

явлениям и свойствам раствора, а также краевым условиям, представлена иерархия соподчинения моделей. Представленная иерархия соподчинения моделей, как показала практика, удобна в использовании. Приведен сопоставительный анализ предложенных математических моделей, определены области применимости и ограничения каждой модели. Проведены краткий обзор, сравнение и анализ полученных результатов численного и асимптотического решений краевых задач математических моделей из предложенной иерархической системы моделей.

Разработаны алгоритмы численного решения краевых задач, соответствующих математических моделей. Осуществлен переход к безразмерному виду с использованием характерных величин, определён физический смысл тривиальных критериев подобия, найдены нетривиальные критерии подобия для 1D моделей.

Проведен ряд исследований структуры диффузионного слоя у отдающего слоя ионообменной мембраны (ИОМ), как в стационарном случае, так и с течением времени. Определены основные закономерности переноса ионов 1:1 соли как при допределельных, так и при запределельных токах, в том числе с учетом реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды и тепловых эффектов. Построено новое, оригинальное асимптотическое решение. Найдено аналитическое решение краевой задачи нестационарного переноса 1:1 электролита в отдающем слое у КОМ, имеющее хорошую точность.

Проведен ряд исследований 1D краевых задач, описывающих перенос ионов в сечении канала обессоливания. Исследованы причины образования и свойства локального максимума (минимума) пространственного заряда в мембранных системах как при допределельных, так и при запределельных токах. Исследованы причины образования и свойства нового эффекта – разряда (пробоя) пространственного заряда. Изучены фундаментальные закономерности этого явления. Показано, что реакция диссоциации/рекомбинации молекул воды не только не приводит к уничтожению двойного электрического слоя у ионообменных мембран, но и создает новый двойной электрический слой в середине канала обессоливания как при допределельных токовых режимах, так и при запределельных.

Впервые проанализирован стационарный перенос ионов бинарной соли в сечении канала обессоливания. Установлены основные закономерности переноса ионов, определена структура сечения КО. Впервые показано, что в области рекомбинации возникает двойной электрический слой из ионов водорода и гидроксидов. Показано, что между областью рекомбинации и квазиравновесными областями пространственного заряда расположены области электронейтральности и равновесия с практически линейным распределением концентраций. Установлено, что пространственный заряд и реакция диссоциации/рекомбинации молекул воды существенно влияют друг на друга и одновременно на перенос ионов соли.

Впервые проанализирован нестационарный перенос ионов бинарной соли в канале обессоливания 2D с учетом реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды. Установлены основные закономерности и строение 2D камеры обессоливания (КО)

электродиализного аппарата. Впервые показано, что в области рекомбинации возникает двойной электрический слой из ионов водорода и гидроксила.

Разработаны программы для ЭВМ 1D моделирования переноса ионов бинарной соли как в диффузионном слое, так и в сечении КО. Программы обладают простым и понятным графическим интерфейсом, кратким описанием решаемой задачи, удобным инструментарием настройки параметров модели и импорта результатов. Эти приложения могут быть использованы для расчетов и оптимизации режимов работы электромембранных аппаратов в инженерной практике, в научных исследованиях и при обучении студентов.

Научная новизна результатов:

1. Определена новая иерархия соподчинения 1D математических моделей переноса ионов бинарной соли и их классификация по свойствам уравнений, области исследования, явлениям и свойствам раствора, а также начальным условиям;

2. Проведено новое численное исследование устойчивости нестационарной краевой задачи, описывающей перенос ионов в диффузионном слое при сверхпределных токах;

3. Разработано новое асимптотическое решение нестационарной краевой задачи переноса ионов бинарной соли, которое основано не только на асимптотических упрощениях в уравнениях, но и на замене точного строения диффузионного слоя приближенным, что является оригинальной особенностью. Другой особенностью асимптотического решения является разработка разных асимптотических разложений в различных областях;

4. Установлены новые фундаментальные закономерности переноса бинарной соли при запределных токовых режимах в диффузионном слое с учетом тепловых эффектов, связанных с реакцией диссоциации/рекомбинации молекул воды и Джоулевым нагревом;

5. Исследованы причины образования и свойства локального максимума (минимума) пространственного заряда в мембранных системах как при допределных, так и при запределных токах;

6. Исследован новый эффект – разряда (пробоя) пространственного заряда и изучены фундаментальные закономерности этого явления;

7. Впервые проанализирован стационарный перенос ионов бинарной соли в сечении канала обессоливания. Установлены основные закономерности переноса ионов соли с учетом реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды, а также влияния этой реакции на пространственный заряд;

8. Впервые проанализирован нестационарный перенос ионов бинарной соли в канале обессоливания 2D с учетом реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды. Установлены основные закономерности переноса ионов соли и структура канала. Впервые показано, что в области рекомбинации возникает двойной электрический слой из ионов водорода и гидроксила. Показано, что процесс образования и развития электроконвективных вихрей связан со сложной структурой

области пространственного заряда, вызванный влиянием реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды на распределение пространственного заряда в канале обессоливания.

Методы и подходы, использованные при реализации проекта (описать, уделив особое внимание степени оригинальности и новизны)

Использование в промышленности электромембранного метода для очистки электролита сдерживается недостаточным количеством теоретических и экспериментальных исследований процесса электродиализа. Учитывая сложность явлений, происходящих в ячейке электродиализного аппарата (ЭДА), особенно при интенсивных токовых режимах, современная теория математического моделирования процессов переноса в электромембранных системах (ЭМС) имеет серьезные недостатки. С другой стороны, пробелы в теории обусловлены математическими и вычислительными трудностями, которые не позволяли вычислять многие важные характеристики процессов переноса в ЭМС. Но с развитием вычислительных мощностей ЭВМ становится возможным численное исследование сложных краевых задач переноса ионов в ЭМС, нерешенных ранее. Это открывает новые возможности применения математического моделирования для решения большого спектра задач.

В связи с этим, тема научного исследования, посвященная разработке новых и модификации уже существующих математических моделей, а также развитию теории переноса ионов в ЭМС с учетом некаталитической реакции диссоциации/рекомбинации молекул воды, численных и асимптотических методов решения является актуальной научной проблемой.

Методология и методы исследования выбраны исходя из постановки решаемой задачи. Для исследования структуры диффузионного пограничного слоя у ионообменной мембраны и структуры канала обессоливания (1D и 2D) использовалось численное моделирование на основе уравнений Нернста-Планка-Пуассона и Навье-Стокса. Численное исследование проводилось с помощью метода конечных элементов. По результатам численного анализа построено асимптотическое решение с применением методов погранслойных функций, последовательных приближений. Асимптотические методы являются одними из наиболее мощных инструментов современной прикладной математики. С помощью асимптотических методов получены приближенные аналитические представления решений весьма сложных линейных и нелинейных краевых задач, как для обыкновенных дифференциальных уравнений, так и для уравнений в частных производных. Приближенное аналитическое решение найдено методом погранслойных функций.

Полученные фундаментальные знания могут быть полезны для оптимизации переноса ионов соли и продуктов диссоциации воды в мембранных системах,

используемых в процессах электродиализа, нано/микрофлюидики, электроосмоса, электрофореза и других.

Участие Аспиранта в научных мероприятиях по тематике проекта за два (первый и второй) этапа реализации проекта (каждое мероприятие с новой строки, указать названия мероприятий и тип доклада)

II Всероссийская научно-практическая конференция молодых ученых «Прикладная математика: современные проблемы математики, информатики и моделирования», 26 апреля 2020 года, г. Краснодар. Тип доклада: очно, устный доклад.

Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспектива-2020», 22-26 июня 2020 года, г. Нальчик. Тип доклада: дистанционно, устный доклад.

Международная научно-практическая конференция «Referatotech», 24 октября 2020 года, г. Краснодар. Тип доклада: очно, устный доклад.

III Всероссийская научно-практическая конференция молодых ученых «Прикладная математика: современные проблемы математики, информатики и моделирования», 20-24 апреля 2021 года, г. Краснодар. Тип доклада: очно, устный доклад.

Участие Аспиранта в экспедициях (полевых исследованиях) по тематике проекта за два (первый и второй) этапа реализации проекта

не предусмотрено

Адреса (полностью) ресурсов в Интернете, подготовленных по проекту

<http://amd-kubsu.ru/project-19-38-90314-part2/>

Приоритетное направление развития науки, технологий и техники РФ, которому, по мнению членов коллектива, соответствуют результаты данного проекта

Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика

Критическая технология РФ, которой, по мнению членов коллектива, соответствуют результаты данного проекта

Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий

Основное направление технологической модернизации экономики России, которому, по мнению членов коллектива, соответствуют результаты данного проекта

Эффективность и энергосбережение, в том числе вопросы разработки новых видов топлива

Направление из Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации

Переход к экологически чистой и ресурсосберегающей энергетике, повышение эффективности добычи и глубокой переработки углеводородного сырья, формирование новых источников, способов транспортировки и хранения энергии